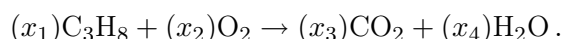


Kemisk balans

Brinnande propangas

Kemiska ekvationer beskriver hur kvantiteter av olika ämnen produceras och konsumeras genom kemiska reaktioner. T.ex. när propangas brinner, reagerar propan (C_3H_8) med syre (O_2) och bildar då koldioxid (CO_2) och vatten (H_2O), enligt en ekvation som har följande form;



För att "balansera" denna ekvation måste en kemist finna positiva heltal x_1, \dots, x_4 sådana att det totala antalet kol-, väte-, och syreatomer på den vänstra sidan motsvaras av ett lika stort antal på den högra sidan (eftersom inga atomer försvinner eller tillkommer genom reaktionen).

Kemisk matematik

En systematisk metod för att balansera sådana kemiska ekvationer är att med hjälp av vektorer ställa upp en ekvation som beskriver antalet atomer av de grundämnen som förekommer i reaktionen. Eftersom den reaktion som beskrivs ovan innehåller tre olika grundämnen - kol, väte och syre - konstruerar vi för varje reagent en vektor i \mathbb{R}^3 som bokför antalet atomer i varje ingående molekyl. Första elementet i vektorn ger antalet kolatomer, andra elementet ger antalet väteatomer och det tredje ger antalet syreatomer enligt följande mönster;

$$C_3H_8 : \begin{pmatrix} 3 \\ 8 \\ 0 \end{pmatrix} \quad O_2 : \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad CO_2 : \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad H_2O : \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Insättning av dessa vektorer i ekvationen ovan ger då att heltalen x_1, \dots, x_4 måste uppfylla

$$x_1 \begin{pmatrix} 3 \\ 8 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = x_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} + x_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

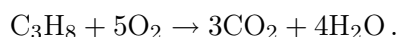
eller

$$x_1 \begin{pmatrix} 3 \\ 8 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} - x_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} - x_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

vilket är ekvivalent med det linjära ekvationssystemet

$$\begin{cases} 3x_1 - x_3 = 0 \\ 8x_1 - 2x_4 = 0 \\ 2x_2 - 2x_3 - x_4 = 0 \end{cases}$$

Gausselimination ger lösningarna $x_1 = \frac{1}{4}t$, $x_2 = \frac{5}{4}t$, $x_3 = \frac{3}{4}t$, $x_4 = t$ där $t \in \mathbb{R}$ är en parameter. Villkoret att x_1, \dots, x_4 skall vara positiva heltal är uppfyllt om vi t.ex. väljer $t = 4$. Då blir $x_1 = 1$, $x_2 = 5$, $x_3 = 3$ och $x_4 = 4$. Den balanserade kemiska ekvationen blir således



Anmärkning. Den kemiska ekvationen blir balanserad för alla val $t = 4n$ där n är ett positivt heltal men kemister föredrar den ekvation där koefficienterna är så små som möjligt.